

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 – Introdução

A literatura a respeito de sistemas granulares é bastante extensa, já que se trata de um campo amplo e interdisciplinar. Como se mencionou no capítulo anterior, tais sistemas despertam grande interesse científico, por conta de suas propriedades não-usuais, e tecnológico, devido às suas diversas aplicações industriais. As primeiras tentativas de descrição teórica de sistemas granulares datam do século XIX, através de trabalhos de pesquisadores como Gotthilf Hagen, Michael Faraday e Osborne Reynolds (Herrmann, 1997; Gallas e Herrmann, 1998). Todavia, o grande impulso da comunidade científica, neste sentido, vem ocorrendo a partir das últimas décadas. Segundo uma afirmação recente de Goldhirsch (2003), “o número de artigos a respeito de materiais granulares publicados na última década provavelmente excede o número total de publicações sobre o assunto feitas até 1990”. Mesmo com todos os esforços, ainda não se alcançou uma formulação teórica consagrada, capaz de explicar os comportamentos exóticos apresentados por estes sistemas, na maioria das vezes oriundos de ações cooperativas entre as partículas. Por outro lado, principalmente devido aos grandes avanços tecnológicos experimentados pela ciência da computação, os métodos de simulação vêm se tornando a ferramenta mais utilizada em estudos desta natureza.

Revisões sobre diversos aspectos do estudo de sistemas granulares são publicados periodicamente, podendo ser encontradas em trabalhos como os de Bridgwater (1976), Cooke *et al.* (1976), Williams (1976), Rumpf (1990), Iinoya *et al.* (1991), Furuuchi e Gotoh (1992), Bideau e Hansen (1993), Herrmann (1997), Gallas e Hermann (1998), Ottino e Khakhar (2000), Rosato *et al.* (2002), Goldhirsch (2003), entre outros. Neste capítulo, reportar-se-á uma breve revisão da literatura a respeito da simulação computacional de sistemas granulares via métodos discretos (de acordo com a classificação proposta no capítulo anterior). Na sua redação, opta-se por um estilo

lacônico, sem descrições detalhadas dos trabalhos examinados, buscando-se privilegiar a sua abrangência. A primeira parte da revisão trata de métodos atemporais, ou seja, aqueles que não envolvem a variável “tempo”. Dentre eles, que são utilizados para a obtenção de configurações estáticas de leitos de partículas e para o estudo da segregação de misturas de submetidas a vibrações mecânicas, destaca-se o Método de Monte Carlo. A segunda parte se refere às técnicas de simulação dinâmica, que se destinam à solução de equações que envolvem derivadas no tempo e que recebem a designação genérica de Dinâmica Granular. Dentre elas, concede-se particular atenção ao Método de Elementos Distintos.

2.2 – Simulação Atemporal de Sistemas Granulares

Neste trabalho, classificam-se como sistemas granulares em equilíbrio aqueles que se encontram em estado estacionário, ou seja, cujas propriedades não variam com o tempo. Dentre os vários tipos de sistemas em equilíbrio, há um interesse especial pelos leitos de partículas aleatoriamente distribuídas, pois eles são encontrados no interior de equipamentos industriais destinados a reações químicas e a processos de purificação de matérias-primas e produtos. Uma informação crucial para o projeto e operação de um equipamento como estes é a disposição dos espaços intersticiais do leito envolvido, pois dela dependerão os fenômenos de transferência de calor, massa e momento que possam nele ocorrer. Em geral, tal disposição pode ser traduzida na forma de perfis de frações locais de vazios.

Já que grande parte dos equipamentos utilizados na indústria possui o forma cilíndrica, especial interesse se destina ao estudo de propriedades estruturais de leitos formados em recipientes com tal geometria. Na maioria dos casos, como há escoamento de fluido no sentido longitudinal do leito, torna-se essencial o conhecimento do seu perfil radial de frações de vazios e, conseqüentemente, da influência causada pela parede lateral do recipiente sobre tal propriedade. Roblee *et al.* (1958) mediram os perfis radiais de fração de vazios em leitos cilíndricos de partículas de diversos formatos, tais como esferas, cilindros e anéis de Raschig. A maioria dos trabalhos examinados, no entanto, destina-se à obtenção exclusiva desta propriedade em leitos de

esferas, uma vez que eles são modelos relativamente simples para leitos de partículas de formas geométricas mais complexas. Muito embora estes últimos possam despertar maior interesse industrial, a análise de suas propriedades é sensivelmente mais intrincada.

Benenati e Brosilow (1962), Ridgway e Tarbuck (1966), Thadani e Peebles (1966), Pillai (1977), Goodling *et al.* (1983), entre outros, mediram a distribuição radial de vazios em leitos de esferas de mesmo tamanho, aleatoriamente compactadas em recipientes cilíndricos com paredes lisas. Nestes trabalhos, analisaram-se diversos valores da razão entre o diâmetro do cilindro e o diâmetro das esferas. Todos estes autores observaram que uma forte ordenação estrutural ocorre nas proximidades da parede e diminui gradativamente em direção ao centro do cilindro. Uma oscilação nos valores de fração de vazios é verificada até uma distância de aproximadamente 4 ou 5 vezes o diâmetro das partículas, onde desaparece tal ordenação estrutural, dando lugar a uma distribuição aleatória. Alguns autores propuseram modelos analíticos para representar e correlacionar este tipo de comportamento (Ridgway e Tarbuck, 1968; Govindarao e Froment, 1986; Kubie, 1988; Mueller, 1991; Mueller, 1992; Mariani *et al.*, 2001).

Além do estudo experimental e teórico sobre a configuração de leitos aleatórios de esferas, vários autores têm desenvolvido métodos de simulação numérica para este tipo de sistema. Tais métodos seguem, na sua maioria, o paradigma das técnicas de Monte Carlo, ou seja, a execução de sorteios aleatórios de possíveis configurações. O método desenvolvido por Adams e Matheson (1972) consiste na deposição sequencial de esferas em um aglomerado formado a partir de um ponto central de atração, ou seja, define-se um ponto no espaço para o qual as esferas são atraídas e sorteiam-se, sequencialmente, as direções de origem da cada esfera. Na direção escolhida, uma esfera toca no aglomerado já formado e avança para uma posição estável. No método desenvolvido por Visscher e Bolsterli (1972), em vez de serem atraídas para um ponto central, as esferas sofrem a influência de um campo gravitacional vertical, sendo atraídas para o fundo de um recipiente. Em tal trabalho, foram utilizadas condições de contorno periódicas nas direções horizontais. Gotoh *et al.* (1978) utilizaram um método similar ao de Visscher e Bolsterli (1972), mas com duas paredes rígidas em uma das direções

horizontais, de modo a determinar a influência de tais paredes no perfil de fração local de vazios. Foi observada uma oscilação dos valores nas proximidades das paredes, semelhante ao que é observado experimentalmente. Outros métodos computacionais, baseados nas idéias de Adams e Matheson (1972) e de Visscher e Bolsterli (1972), foram desenvolvidos por outros autores, visando uma melhor eficiência computacional e o estudo de sistemas de polidispersas esferas, ou seja, misturas de partículas de diferentes diâmetros (Jodrey e Tory, 1979; Rodríguez *et al.*, 1986; Mueller, 1997).

Reyes e Iglesia (1990) utilizaram uma técnica similar à desenvolvida por Jodrey e Tory (1979) para obter configurações de leitos monodispersos de esferas em recipientes cilíndricos e, então, determinaram os perfis radiais de frações de vazios dos leitos simulados. Observaram-se ordenações estruturais (oscilações nos valores de fração de vazios) nas proximidades das paredes, porém menos acentuadas que aquelas observadas por outros autores em leitos reais. Abreu *et al.* (1999) aplicaram o Método de Monte Carlo propriamente dito, tal como será descrito no Capítulo 3, para obter configurações estacionárias de leitos deste tipo, alcançando resultados mais realistas que os de Reyes e Iglesia (1990) para a distribuição radial de frações de vazios. Além disto, Abreu (2000) estudou a compactação de esferas em recipientes cônicos e observou o mesmo tipo de ordenação nas proximidades das paredes.

Soppe (1990) utilizou o Método de Monte Carlo para obter configurações de leitos de esferas polidispersos e calculou, em seguida, a fração de sólidos (ou densidade de compactação, como também é chamada) de cada um deles. Demonstrou-se, então, que configurações obtidas através do Método de Monte Carlo apresentam frações de sólidos menores que 0,60, o que é típico de leitos denominados, na língua inglesa, de *random-loose packings*. Esta conclusão foi corroborada pelos trabalhos de Abreu *et al.* (1999) e Abreu (2000). Ao que parece, arranjos mais densos, com frações de sólidos em torno de 0,64, comumente chamados de *random-close packings*, não são obtíveis através do referido método. Nolan e Kavanagh (1992) desenvolveram um procedimento capaz de fornecer configurações com qualquer fração de sólidos entre os valores típicos dos dois arranjos mencionados. Em tal método, define-se a fração de sólidos *a priori* e, então, insere-se um número de esferas suficiente para perfazê-la em um recipiente

cilíndrico, sem se levar em conta a ocorrência de interpenetrações. Em seguida, através de um processo iterativo e gradual, transforma-se o leito inicial em uma configuração livre de interpenetrações e mecanicamente estável (dentro de certos limites tolerados), através de alterações aleatórias e posteriores correções nas posições das esferas.

No caso da simulação atemporal de leitos partículas não esféricas, o número de trabalhos publicados é muito menor. Entre eles, pode-se citar o trabalho de Nolan e Kavanagh (1995), no qual se utilizaram conjuntos de esferas interpenetradas para modelar partículas de diferentes formas geométricas. O algoritmo para obtenção dos leitos é um desdobramento daquele descrito no parágrafo anterior (Nolan e Kavanagh, 1992). Nandakumar *et al.* (1999) utilizaram técnicas de geometria computacional para detectar contatos entre partículas construídas como conjuntos de superfícies triangulares e conseguiram, através de um método semelhante ao de Visscher e Bolsterli (1972), obter leitos de partículas de geometria complexa, tais como anéis de Raschig. Mais recentemente, Williams e Philipse (2003) desenvolveram uma técnica denominada por eles de “Contração Mecânica”, com a qual obtiveram configurações de leitos compactos de partículas esferocilíndricas (*Cf.* Capítulo 3). Em tal método, primeiramente se define um sistema de partículas aleatoriamente posicionadas e orientadas, de baixíssima densidade e livre de interpenetrações, em uma célula cúbica com condições de contorno periódicas. Então, em pequenos e subseqüentes decrementos, altera-se o volume da célula, reposicionando-se as partículas e eliminando-se eventuais interpenetrações.

Um outro fenômeno importante, que afeta diversos processos industriais, é a segregação de misturas submetidas a vibrações mecânicas, tal como exposto no Capítulo 1. Este fenômeno é observado com frequência em sistemas reais e foi estudado em laboratório por diversos autores, tal como pode ser constatado em vários dos trabalhos de revisão citados na seção anterior. Baseando-se na análise de diversos dados experimentais, autores como Williams (1976) e Rosato *et al.* (2002) afirmam que fatores como diferenças na forma geométrica e na densidade das partículas exercem pouca influência sobre o fenômeno, sendo ele dominado fortemente por efeitos de diferença de tamanho, sendo então denominado de “Efeito Castanha-do-Pará”.

A despeito de sua característica intrinsecamente dinâmica, tem-se demonstrado ser possível investigar a segregação de partículas através do Método de Monte Carlo. Rosato *et al.* (1986, 1987, 1991) foram os primeiros a praticar este tipo de investigação, simulando, com sucesso, a segregação de misturas de discos rígidos (sistemas bidimensionais) sob efeito de campo gravitacional e submetidas a agitação mecânica. Os sistemas simulados eram compostos por discos de diferentes tamanhos confinados em caixas com condições de contorno periódicas nas laterais e paredes rígidas no fundo e no topo. A vibração mecânica era introduzida no método fazendo-se com que, após um determinado número de passos de Monte Carlo, todas as partículas sofressem uma elevação simultânea. Após este deslocamento, continuava-se a execução dos passos, até que uma nova vibração fosse realizada. Com os resultados obtidos, os autores foram capazes de formular uma explicação para o fenômeno, ao qual atribuíram uma origem fundamentalmente geométrica, tal como será explicado oportunamente neste trabalho.

Devillard (1990) utilizou o procedimento de Rosato *et al.* (1986) para também simular a segregação de discos rígidos, e utilizou os resultados para propor uma lei de escala para a velocidade de segregação em função da amplitude de vibração e da diferença de tamanho entre as partículas envolvidas. Castier *et al.* (1998) estenderam o método para sistemas tridimensionais e simularam a segregação de misturas binárias de esferas quase-rígidas. Tal trabalho levou à conclusão de que misturas de partículas de mesmo tamanho, mas densidades distintas, não segregam sob a influência de vibrações mecânicas, a não ser para partículas de dimensões muito reduzidas (com diâmetros da ordem de 1 μm), corroborando a asserção de que diferenças de densidade exercem pouca importância sobre o fenômeno. No trabalho de Castier *et al.* (1998), foram considerados apenas sistemas com condições de contorno nas direções laterais e paredes rígidas apenas no topo e no fundo. Abreu (2000), por outro lado, utilizou a técnica de Castier *et al.* (1998) para simular a segregação de partículas de diferentes tamanhos em recipientes cilíndricos, mostrando que as paredes laterais em nada interferem na ocorrência do fenômeno.

Outra vertente do uso do método de Monte Carlo para simulação de sistemas granulares consiste no estudo de sistemas fluido-partículas. Nos trabalhos de Seibert e

Burns (1996) e Castier *et al.* (1998), realizam-se simulações para determinar perfis espaciais de concentração de partículas em sistema coloidal submetido a campos gravitacionais de diferentes intensidades. Seibert e Burns (1996) também utilizaram o método de Monte Carlo para determinar a distribuição de partículas (esferas rígidas) em leitos fluidizados. Em trabalho mais recente, os mesmos autores (Seibert e Burns, 1998) simularam a fluidização e segregação de misturas binárias de esferas rígidas.

Como se nota, o Método de Monte Carlo possui a vantagem, frente aos demais, de poder ser usado tanto no estudo da formação de leitos aleatórios de partículas quanto na simulação de fenômenos de segregação. Em todos os trabalhos examinados, contudo, o método foi aplicado somente a sistemas compostos por esferas, de modo que não foi possível avaliar o efeito da forma geométrica das partículas sobre tais comportamentos de materiais granulares. Em relação à fração de sólidos ou, em contrapartida, à porosidade de leitos aleatórios, outros métodos foram aplicados com tal finalidade, como exposto previamente na presente seção. Experimentalmente, Zou e Yu (1996) investigaram as características de leitos compactos de partículas monodispersas de diversos formatos. No caso de misturas, sabe-se que é possível separar partículas de diferentes formas geométricas tirando-se vantagem de certas discrepâncias em suas propriedades dinâmicas (Furuuchi e Gotoh, 1996). Contudo, devido à dificuldade prática de isolar os efeitos de forma geométrica e tamanho, já que isto exigiria a obtenção de partículas de mesmos volume e densidade, mas de diferentes formatos, resultados experimentais sobre a segregação de partículas exclusivamente devida a diferenças de geometria não foram encontrados. Assim sendo, esta importante questão a respeito do comportamento de sistemas granulares continua sem respostas. Neste contexto, a simulação computacional se apresenta como uma promissora alternativa, pois que, neste caso, a referida dificuldade prática não existiria. Na primeira parte desta tese, o Método de Monte Carlo, tal como utilizado nos trabalhos prévios de Castier *et al.* (1998), Abreu *et al.* (1999) e Abreu (2000), é aprimorado e estendido para aplicação a sistemas de partículas não-esféricas, tornando factível a investigação das questões aludidas neste parágrafo.

2.3 – Simulação Dinâmica de Sistemas Granulares

Muito trabalho tem sido feito, principalmente após o início da década de 1990, em respeito à simulação de sistemas granulares através de técnicas semelhantes à Dinâmica Molecular (Allen e Tildesley, 1987; Frenkel e Smith, 1996). Estes métodos, que costumam receber denominações genéricas como “Simulações de Partículas Discretas” (Lian *et al.*, 1998; Tsuji, 2000) ou “Dinâmica Granular” (Hoomans *et al.*, 1996; Smith e Tüzün, 2002), baseiam-se na descrição das trajetórias de todas as partículas de um sistema através da integração das equações do movimento (2ª Lei de Newton) correspondentes a cada uma delas. Como ilustração do crescente interesse por este tipo de enfoque, pode-se fazer referência ao Volume 109 da revista *Powder Technology*, publicado em abril de 2000, que se trata de uma edição especial, com 22 artigos, inteiramente dedicada a trabalhos inseridos neste contexto. Na presente seção, busca-se demonstrar a utilidade de métodos desta natureza ao estudo do comportamento de meios granulares, enfatizando-se a sua aplicação a sistemas de interesse industrial.

De acordo com Tsuji (2000), a modelagem discreta de meios granulares, segundo as interações entre partículas, pode ser classificada da seguinte forma:

- (a) Fluxos livres de colisão (baixa densidade granular);
- (b) Fluxos dominados por colisões (média densidade granular);
- (c) Fluxos dominados por contatos (alta densidade granular):
 - (c.1) Influência de fluido desprezível;
 - (c.2) Influência de fluido significativa.

Na classificação acima, os Grupos (a) e (b) correspondem a sistemas de partículas dispersas em fluidos, de tal forma que a dinâmica destes é importante (Tsuji, 2000). Os sistemas classificados como pertencentes ao Grupo (a) são aqueles em que as colisões entre partículas raramente ocorrem e, conseqüentemente, podem ser desconsideradas. Estudos de sistemas deste tipo concentram-se na descrição da difusão de partículas isoladas no interior de fluidos em escoamento, e seu tratamento teórico é, em certos casos, relativamente simples. As simulações são, geralmente, realizadas em duas etapas:

o cálculo dos perfis de velocidade e de pressão do fluido através de técnicas de CFD (*fluidodinâmica computacional*) e a posterior inserção de partículas, cujos movimentos não interferem no escoamento predeterminado para o fluido.

Um sistema pertencente ao Grupo (b) apresenta uma concentração de partículas alta o bastante para que as colisões entre elas exerçam influência significativa sobre o seu comportamento. Porém, a duração de uma colisão é muito pequena, quando comparada ao intervalo entre duas delas, o que permite tratá-las como instantâneas. Desta forma, as velocidades de duas partículas, antes e após uma colisão, podem ser correlacionadas através de modelos de forças impulsivas e de um determinado coeficiente de restituição, responsável por inserir nos cálculos uma dissipação de energia promovida pela colisão. Portanto, apenas colisões binárias são consideradas. A modelagem empregada no cálculo das interações entre as partículas (impulsos) pode apresentar diferentes graus de sofisticação. Ouyang e Li (1999a e 1999b) simularam sistemas bidimensionais e consideram as partículas como sendo circulares e lisas, interagindo apenas através de repulsão. Johnson e Tezduyar (1997) e Cartaxo e Rocha (2001) utilizaram esta mesma abordagem, mas para sistemas tridimensionais. Outros autores, tais como Hoomans *et al.* (1996), Tsuji *et al.* (1998) e Hoomans *et al.* (2000 e 2001), utilizaram modelos mais complexos, considerando atrito entre as partículas.

Como mencionado, a modelagem relativa ao Grupo (b) é adequada à simulação de sistemas sólido-fluido com média densidade granular. Neste caso, as equações de movimento do fluido e das partículas são simultaneamente resolvidas, acopladas através de forças de interação. As formas de se realizar tal acoplamento serão discutidas mais adiante. Hoomans *et al.* (1996) e Ouyang e Li (1999a) utilizaram esta técnica para simular o comportamento de leitos fluidizados por gás, conseguindo observar a formação de bolhas e intermitências (*slugs*). Hoomans *et al.* (2001) validaram resultados deste tipo através da comparação com dados experimentais. A formação de aglomerados em leitos fluidizados circulantes foi simulada por Tsuji *et al.* (1998) e por Ouyang e Li (1999b). Adicionalmente, Hoomans *et al.* (2000) estudaram a segregação de misturas de partículas de diferentes tamanhos em leitos fluidizados, mostrando que a presença de bolhas favorece a mistura do sistema, impedindo que tal segregação

ocorra. Todos estes trabalhos foram realizados com sistemas bidimensionais, de forma a reduzir o tempo computacional requerido. Diferentemente, Johnson e Tezduyar (1997) e Cartaxo e Rocha (2001) realizaram simulações de sistemas tridimensionais, a respeito da sedimentação de esferas em meio líquido e do transporte pneumático de partículas esféricas em *risers* cilíndricos, respectivamente.

Sistemas do Grupo (c), segundo a classificação de Tsuji (2000), são aqueles que apresentam altas concentrações de partículas. Neste caso, as colisões não podem ser consideradas instantâneas, porque partículas podem permanecer em contato durante longos períodos. Portanto, a modelagem da interação entre elas deve ser feita por meio de forças de contato. Diante disto, Cundall e Strack, em 1979, propuseram uma metodologia denominada por eles de “Método de Elementos Distintos”. Quando duas partículas se impelem mutuamente, surgem forças de repulsão devidas a deformações ocasionadas em ambas. Uma descrição acurada destas deformações seria demasiadamente complexa, dificultando a simulação de sistemas com muitas partículas. A solução proposta por Cundall e Strack (1979) é permitir que haja interpenetrações (*overlaps*) entre duas partículas em contato e assumir que a sua profundidade corresponde à soma das deformações de ambas. Então, aplica-se uma lei de força-deslocamento, tal como a Lei de Hooke (linear) ou a Lei de Hertz (não-linear), para cálculo da força de repulsão. Para se contabilizar a dissipação de energia de colisões inelásticas, considera-se também uma força de amortecimento, geralmente proporcional à velocidade relativa com a qual as partículas se interpenetram. A mesma modelagem é aplicada na direção tangencial ao contato, o que permite a simulação de partículas com atrito. Neste caso, leva-se em consideração a possibilidade de haver deslizamentos entre as partículas se a força tangencial ultrapassar um certo limite crítico que, segundo a Lei de Atrito de Coulomb, é proporcional à magnitude da força normal.

A metodologia de Cundall e Strack (1979), que passou a ser também referida como Método de Elementos Discretos (em oposição à modelagem contínua) ou, simplesmente, DEM, tornou-se uma das técnicas mais utilizadas na simulação computacional de sistemas granulares, principalmente após o início da década de 1990. Inicialmente, apenas partículas circulares e esféricas faziam parte da modelagem do

DEM. Atualmente, partículas de diversas formas geométricas, tais como elipsóides (Ouadfel e Rothenburg, 1999; Vu-Quoc *et al.*, 2000), superquádricas (Cleary, 2000) ou poliedros (Cundall, 1988; Cundall *et al.*, 1988; Matuttis, 2000), são consideradas. No entanto, devido à sua maior facilidade de manipulação (detecção de contatos e cálculo de forças), as formas originais continuam a ser as mais empregadas. Detalhes sobre os fundamentos e a formulação do DEM, bem como sobre a evolução que tal método vem experimentando desde a sua concepção, não são objetos desta revisão, pois serão apresentados no Capítulo 5. Neste capítulo, dá-se ênfase aos aspectos relacionados à sua aplicação.

Pode-se melhor compreender o avanço na utilização do DEM por meio do histograma mostrado na Figura 2.3.1, que mostra o número de publicações científicas, ao longo dos anos, nas quais há menção ao artigo de Cundall e Strack (1979), de acordo com informações compiladas no dia 04 de março de 2004 a partir do banco de dados *ISI Web of Science*® (<http://isi3.isiknowledge.com>).

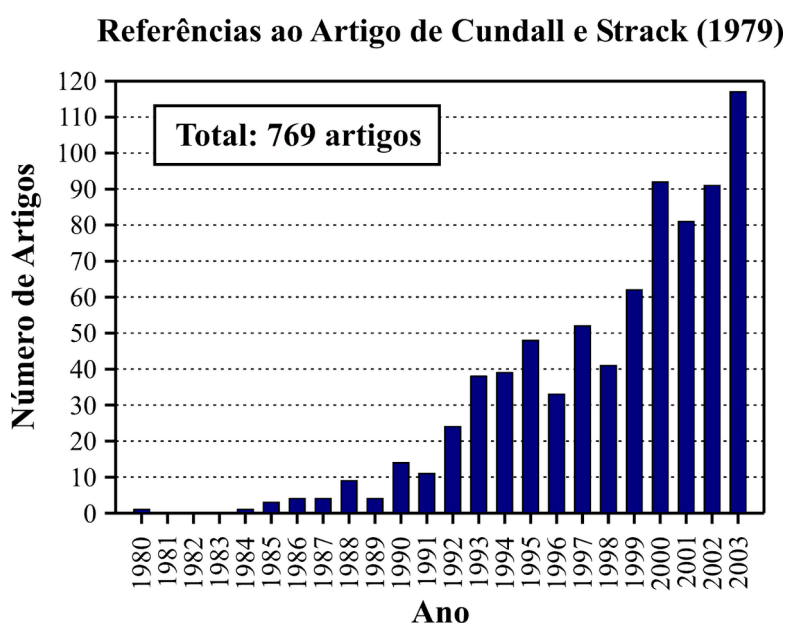


Figura 2.3.1 – Número de artigos com menção ao trabalho de Cundall e Strack (1979).

Fonte: *ISI Web of Science*® (<http://isi3.isiknowledge.com>), consultado em 04/03/2004.

Como se nota na Figura 2.3.1, somente em 26 artigos o trabalho de Cundall e Strack (1979) foi citado nos dez primeiros anos após a sua publicação (1980-1989). Em

1999, este número havia aumentado para 395. Até 2003, este número praticamente dobrou, chegando a 769 artigos. Em 2000, particularmente, houve referências a tal trabalho em 92 artigos, dentre os quais constam 16 pertencentes ao mencionado volume da *Powder Technology*. Cabe a ressalva de que o histograma da Figura 2.3.1 não representa exatamente o número de trabalhos nos quais se emprega o DEM, já que há autores que o utilizam sem fazer referência ao artigo original, e vice-versa. Entretanto, os números apresentados, além de demonstrarem uma grande aceitação do DEM por parte da comunidade científica internacional (o que atesta a utilidade e a confiabilidade do método), permitem projeções de um avanço ainda maior no número de aplicações durante os próximos anos.

Retornando-se à classificação de Tsuji (2000), o Grupo (c) pode ainda ser subdividida. O chamado de Subgrupo (c.1) se refere aos sistemas nos quais não há interferência de fluidos no escoamento granular. Contrariamente, os sistemas do Subgrupo (c.2) são aqueles nos quais a interação entre fluido e partículas exerce influência significativa sobre o comportamento de ambos. O DEM, com devidas adaptações, tem-se mostrado adequado ao estudo de sistemas pertencentes a ambos.

Como exemplos da aplicação do DEM à simulação de sistemas do Subgrupo (c.1), citam-se alguns dos trabalhos encontrados na literatura. Haff e Werner (1986), por exemplo, utilizaram o DEM para simular o “efeito castanha-do-pará” em misturas bidimensionais contendo diversas partículas circulares de mesmo diâmetro e uma única partícula com diâmetro maior que as demais (usualmente referida como *intruder*), mostrando que o método é eficaz na previsão deste efeito cooperativo. Dez anos mais tarde, Gallas *et al.* (1996) realizaram o mesmo tipo de simulação, porém considerando sistemas tridimensionais. Gallas *et al.* (1992), Lan e Rosato (1997) e Yang e Hsiau (2000) empregaram o DEM em estudos sobre a formação de células de convecção em leitos granulares submetidos a agitação mecânica. Lan e Rosato (1995) utilizaram uma versão simplificada do método (considerando-se partículas sem atrito) para obter propriedades de leitos de esferas sob vibração, tais como perfis de densidade e temperatura granular. Cheng *et al.* (2000) estudaram a dinâmica da formação de leitos compactos bidimensionais de partículas circulares. Fernando e Wassgren (2003)

investigaram o efeito do atrito entre as partículas e as paredes de um recipiente e do método de vibração (senoidal ou pulsante) sob a configuração de leitos bidimensionais. Malik *et al.* (2003) simularam o movimento de leitos mono e bidispersos no interior de recipientes sujeitos a oscilações pendulares. Referências a outras aplicações do DEM ao estudo de fenômenos como convecção e segregação em meios granulares podem ser encontradas no trabalho de revisão realizado por Rosato *et al.* (2002).

O processo de descarga de equipamentos como silos e tremonhas foi estudado, através do DEM, por autores como Masson e Martinez (2000), Yang e Hsiau (2001a), Wassgren *et al.* (2002) e Cleary e Sawley (2002). Nestes trabalhos, investigaram-se os efeitos sobre o processo causados por variações nas propriedades mecânicas das partículas, pela inserção de anteparos no interior do equipamento, pela imposição de oscilações verticais e pelo formato das partículas. Karion e Hunt (2000) simularam a formação de escoamentos granulares do tipo *Couette Flow*, isto é, promovidos por um movimento relativo entre duas placas planas paralelas, medindo os resultantes perfis de velocidade e observando a segregação causada em misturas. McCarthy *et al.* (2000) simularam processos de homogeneização de partículas em misturadores rotatórios bidimensionais circulares. Moakher *et al.* (2000) compararam resultados experimentais com simulações sobre a homogeneização e a segregação em misturadores rotatórios tridimensionais de diversos formatos. Diversos autores têm utilizado o DEM para simular a movimentação de carga moedora em diversos tipos de moinhos, o que pode ser conferido na recente revisão de Mishra (2003a e 2003b).

Os trabalhos citados nos parágrafos anteriores contêm resultados de simulações de partículas não-coesivas. No entanto, a modelagem do DEM, diferentemente daquela empregada para sistemas do Grupo (b), é naturalmente susceptível à inserção de forças de adesão, tais como forças capilares provocadas por pontes de líquido. Valendo-se de tal artifício para simular sistemas de partículas molhadas, Lian *et al.* (1998) investigaram a coalescência de aglomerados de partículas provocada por impactos, Muguruma *et al.* (2000) avaliaram o movimento de partículas em moinhos centrífugos, Yang e Hsiau (2001b) pesquisaram a formação de células de convecção em leitos

vibrantes, e Hsiau e Yang (2003) estudaram o processo de misturação em leitos submetidos a vibrações mecânicas.

De especial interesse para o campo da Engenharia Química são os sistemas sólido-fluido com alta densidade granular, ou seja, aqueles pertencentes ao Subgrupo (c.2) da classificação de Tsuji (2000). Neste caso, assim como na modelagem dos sistemas do Grupo (b), necessita-se de um acoplamento entre as equações de movimento do fluido e as das partículas, o que se traduz na união de técnicas de Fluidodinâmica Computacional (CFD) e de Dinâmica Granular. Diversas metodologias de acoplamento foram desenvolvidas e aplicadas a sistemas sólido-fluido.

O método direto, no qual as duas fases são tratadas em seus respectivos espaços, foi utilizada por Johnson e Tezduyar (1997). Em cada passo de integração, as equações de Navier-Stokes eram resolvidas para o fluido via Método de Elementos Finitos, considerando-se as condições de contorno convenientes nas fronteiras com as partículas. Então, o arrasto exercido sobre estas era calculado, de modo a se poder computar as suas posições e velocidades no passo seguinte. Tal metodologia envolvia uma recorrente geração de malhas refinadas no espaço em torno das partículas. Desta forma, mesmo utilizando recursos computacionais de alto desempenho, com dezenas de processadores em paralelo, os autores conseguiram simular, em tempo aceitável, sistemas tridimensionais com apenas 101 partículas.

A investigação de problemas práticos, no entanto, exige a manipulação de sistemas com números muito maiores de partículas. Em 1993, Tsuji, Kawagushi e Tanaka, visando simular a fluidização por gás de partículas granulares bidimensionais, apresentaram uma bem-sucedida alternativa à metodologia descrita acima, que consiste em dividir o espaço total do sistema em grandes células, cujas dimensões sejam suficientes para conter diversas partículas, tal como no esquema da Figura 2.3.2. O objetivo desta divisão é utilizar estas células como uma malha para a discretização espacial das equações de movimento do fluido. Então, os perfis instantâneos de pressão e velocidade do mesmo são calculados, considerando-se a porosidade de cada célula e as forças de resistência das partículas ao arrasto provocado pelo fluido. Tal força de

arrasto, calculada através de correlações empíricas, é inserida no campo de forças das partículas para a solução das equações de Newton. Executa-se, então, uma integração no tempo, efetuando-se os devidos movimentos das partículas. Em seguida, repete-se todo o procedimento, mas considerando-se o novo perfil de porosidades e forças de resistência. Para a solução das equações do fluido, Tsuji *et al.* (1993) empregaram o Método de Volumes Finitos (Patankar, 1981), mas outras técnicas podem ser utilizadas. Com isto, os referidos autores conseguiram prever certos comportamentos de leitos fluidizados, tais como a formação e ascensão de bolhas. De fato, a metodologia ora descrita fora publicada por Tsuji, Tanaka e Ishida em 1992, que estudaram o transporte pneumático de partículas em tubos horizontais, porém de forma bem mais simples, considerando-se o fluido com escoamento unidimensional e velocidade superficial constante. Para se apreciar uma descrição mais aprofundada a respeito da união entre técnicas de Fluidodinâmica Computacional e métodos de Dinâmica Granular, pode-se consultar o trabalho de Kafui *et al.* (2002).

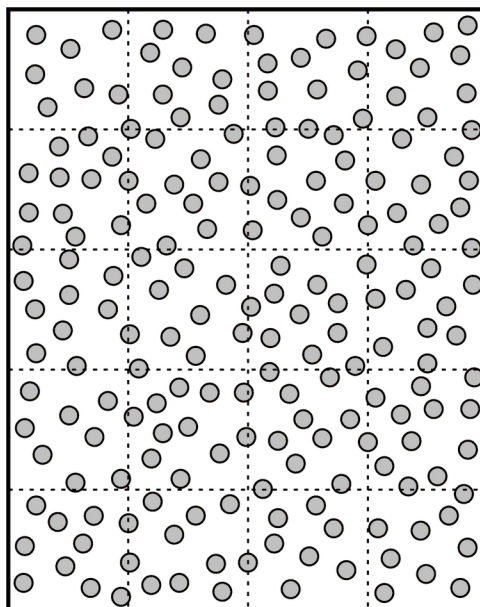


Figura 2.3.2 – Esquema da divisão em células do espaço simulado para acoplamento entre as equações do movimento de fluido e partículas.

Com a publicação dos trabalhos de Tsuji *et al.* (1992 e 1993), o DEM passou a ser empregado na simulação de sistemas correspondentes ao Subgrupo (c.2). Xu e Yu (1997), por exemplo, simularam sistemas semelhantes aos abordados no estudo de Tsuji

et al. (1993), ou seja, leitos fluidizados de partículas bidimensionais. Kawaguchi *et al.* (1998) também o fizeram, mas tanto para sistemas bidimensionais quanto para sistemas tridimensionais, mostrando que as maiores diferenças de comportamento entre eles se verificam nos instantes iniciais da fluidização. Rong *et al.* (1999) estudaram o movimento de partículas e bolhas ao redor de tubos imersos em leitos fluidizados bidimensionais. Kaneko *et al.* (1999) resolveram, em conjunto com as equações do movimento, equações de balanço de energia e modelos cinéticos, o que possibilitou a simulação de processos de polimerização de olefinas (produção de poli-etileno e poli-propileno) em leito fluidizado. Kawaguchi *et al.* (2000) simularam a formação de leitos de jorro em recipientes cilíndricos, resolvendo bidimensionalmente o fluxo do gás (em coordenadas cilíndricas) e de forma tridimensional o movimento das partículas. Xu *et al.* (2000) simularam o movimento de sistemas de partículas provocado por rajadas laterais de gás. Rhodes *et al.* (2001b) estudaram a homogeneização de misturas de partículas em leitos fluidizados e propuseram um método estatístico para classificá-lo. Mishra e Mehrotra (2001) utilizaram uma modelagem unidimensional para o movimento de um fluido e, acoplando-a ao DEM, simularam a estratificação de partículas com o uso de jagues. Watano *et al.* (2003) compararam resultados numéricos (obtidos através do DEM) e experimentais sobre a eletrificação de partículas durante em processos de transporte pneumático, verificando boa concordância.

Empregando modelos para forças de adesão, Mikami *et al.* (1998) estudaram o comportamento de leitos fluidizados de partículas úmidas. Kuwagi *et al.* (2000) simularam a coesão de sólidos metálicos em leitos fluidizados a altas temperaturas. Rhodes *et al.* (2001a) utilizaram um modelo simples de força coesiva para estudar a sua influência sobre características da fluidização por gás. Os mesmos autores (Rhodes *et al.*, 2001b) investigaram a transição entre os comportamentos borbulhante e coesivo em leitos fluidizados. Ainda no contexto de partículas adesivas, Higashitani *et al.* (2001) utilizaram o DEM para simular processos de deformação e quebra de agregados de partículas tridimensionais imersas em fluidos viscosos. Kuwagi e Horio (2002) realizaram simulações bidimensionais para investigar os mecanismos de aglomeração de pequenas partículas ($\sim 10^{-4}$ m) em leito fluidizado. Finalmente, Wang e Rhodes (2004) simularam processos de desfluidização por formação de aglomerados.

Através da presente revisão, espera-se ter sido possível atestar a utilidade e a aplicabilidade do Método de Elementos Distintos no estudo de sistemas granulares de importância tecnológica e industrial. Tendo-se em vista a vastidão de problemas relacionados a esta área, numerosos estudos ainda podem ser realizados com o DEM, bastando-se, para isto, que se possuam as ferramentas computacionais adequadas. Como exemplos de sistemas e processos industrialmente importantes sobre os quais não foram encontrados estudos deste tipo, citam-se a separação de misturas sólido-fluido por meio de equipamentos como ciclones ou hidrociclones, os processos de secagem de grãos e a sedimentação de sólidos em suspensão. A principal dificuldade encontrada no emprego do DEM à exploração de sistemas como estes reside na sua grande demanda de esforço computacional. Portanto, para que se torne exeqüível a simulação de sistemas cada vez mais complexos, é essencial que se consiga aumentar a eficiência do método, reduzindo-se, assim, o esforço exigido. Identifica-se que um espaço para melhorias se encontra no aspecto da resolução das equações do movimento das partículas. Como se discutirá no Capítulo 5, métodos explícitos são utilizados na maior parte dos trabalhos nos quais se emprega o DEM. Provavelmente, a adoção de um método mais preciso poderia permitir o uso de passos de integração maiores e, com isto, encurtar o tempo total de uma simulação. Também com o intuito de economizar esforço computacional, muitos autores se valem de modelagens bidimensionais dos sistemas. Ademais, tal artifício tem o atributo de facilitar sobremaneira a implementação do DEM. Entretanto, sem a devida verificação, não se pode garantir que um dado sistema real tridimensional seja bem descrito por este tipo de abordagem. Portanto, considera-se importante a implementação do DEM na sua forma plena, ou seja, empregando-se uma modelagem tridimensional, de modo que se possa fazer tal tipo de verificação, já que a simulação de sistemas bidimensionais pode ser considerada como um caso particular.